



**SÄÄTÖTEKNIIKAN LABORATORIO**

**Lähi-infrapunamittauksen  
epälineaarinen kalibrointi  
neuroverkoilla ja neuro-sumeilla  
menetelmillä**

Aki Sorsa ja Jari Näsi

Raportti B No 54, Tammikuu 2005

**Oulun yliopisto**  
**Säätötekniikan laboratorio**  
**Raportti B No 54, Tammikuu 2005**

## **LÄHI-INFRA-PUNAMITTAUKSEN EPÄLINEAARINEN KALIBROINTI NEUROVERKOILLA JA NEURO-SUMEILLA MENETELMILLÄ**

Aki Sorsa ja Jari Näsi

Oulun yliopisto, Säätötekniikan laboratorio

**Tiivistelmä:** Kosteutta mitataan yleisesti optisilla mittalaitteilla käyttäen lähi-infrapuna-aallonpituuksia. Kalibroitaisuoran avulla kosteus voidaan määrittää yksikäsitteisesti ja tarkasti. Joillakin rikastenäytteillä mittauksen ja kosteuden välinen riippuvuus ei ole lineaarinen, vaan kosteuden määrittämiseksi joudutaan käyttämään kehittyneempiä menetelmiä. Tässä tutkimuksessa selvitettiin neuroverkkojen ja neuro-sumeiden menetelmien soveltuvuutta epälineaariseen kalibrointiin. Lisäksi tutkittiin mahdollisuutta tuottaa mittausaineistosta lisäinformaatiota, jolla kalibroinnin luotettavuutta voidaan parantaa.

Käytettävänä aineistona olivat veden absorbanssispektrit 14 eri kosteuspitoisuudelta. Ongelmana kalibroinnissa oli mittausten epävarmuus. Tämän vuoksi aineistoja karsittiin ja interpoloitiin tarvittaessa lisää. Aineiston vähyyden vuoksi riippumatonta testausaineistoa ei ollut saatavilla.

Niin neuroverkot kuin neuro-sumeat menetelmätkin soveltuivat hyvin kalibrointiin. Myös lisäinformaatiota onnistuttiin tuottamaan mallintamalla mittausaineistosta erilaisia suureita. Virheen mallinnuksessa muodostettiin ideaalinen kalibroitaisuora, jonka poikkeama mittauksista mallinnettiin. Piirre-erojen mallinnuksessa muodostettiin useita kalibroitaisuoria, joiden väliset erot mallinnettiin.

**Avainsanat:** epälineaarinen kalibrointi, neuroverkot, neuro-sumeat menetelmät, ANFIS

**ISBN 951-42-7634-5**  
**ISSN 1238-9404**

**Oulun yliopisto**  
**Säätötekniikan laboratorio**  
**PL 4300**  
**FIN-90014 OULUN YLIOPISTO**

# SISÄLLYSLUETTELO

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 1     | JOHDANTO .....  | 1  |
| 2     | MITTAUKSET .....  | 2  |
| 3     | KALIBROINNISSA KÄYTETYT AINEISTOT .....                             | 3  |
| 4     | KALIBROINNISSA KÄYTETYT MENETELMÄT .....                            | 5  |
| 4.1   | Lineaarinen kalibrointi .....                                       | 5  |
| 4.2   | Neuroverkkokalibrointi .....  | 6  |
| 4.3   | Neuro-sumeat menetelmät kalibroinnissa .....                        | 6  |
| 4.3.1 | Takagi-Sugeno–tyyppiset sumeat systeemit .....                      | 7  |
| 4.3.2 | Neuro-sumeat mallit .....   | 7  |
| 4.3.3 | Neuro-sumean mallin opetus .....                                    | 9  |
| 5     | KALIBROINTI .....   | 11 |
| 5.1   | Suorien mittauksien mallinnus neuroverkoilla .....                  | 11 |
| 5.1.1 | Tulomuuttujien määrän vaikutus .....                                | 11 |
| 5.1.2 | Neuronien lukumäärän vaikutus .....                                 | 12 |
| 5.1.3 | Kalibrointimalli .....  | 13 |
| 5.2   | Suorien mittauksien mallintaminen neuro-sumeilla menetelmillä ..... | 14 |
| 5.3   | Virheen mallintaminen .....   | 16 |
| 5.4   | Piirre-erojen mallintaminen .....                                   | 18 |
| 5.5   | Menetelmien yhdistäminen kalibroinnissa .....                       | 20 |
| 6     | TULOSTEN TARKASTELO .....   | 21 |
| 6.1   | Kosteuden mallintaminen suoraan mittauksista .....                  | 21 |
| 6.2   | Epäsuorien mittauksien mallintaminen .....                          | 21 |
| 7     | YHTEENVETO .....  | 22 |
|       | LÄHDELUETTELO .....   | 23 |

# 1 JOHDANTO

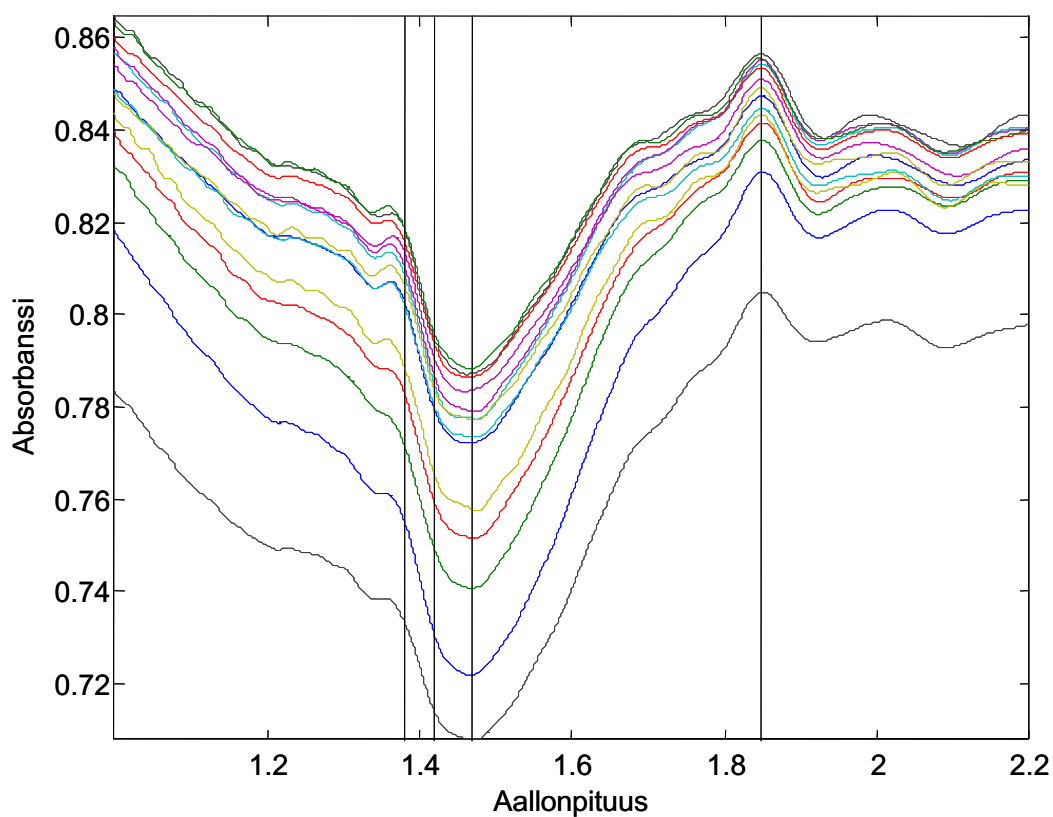
Kosteutta mitataan yleisesti optisilla mittalaitteilla käyttäen lähi-infrapuna-aallonpituuksia. Vesi absorboi tiettyjä aallonpituuksia, joita mittaamalla näytteen kosteus voidaan määrittää kalibroitisuoran avulla. Kalibroitisuora kuvaa mitattujen absorbanssien ja kosteuksien välillä vallitsevaa riippuvuutta ja siihen vaikuttaa mitattava materiaali, mittalaite, mittausolosuhteet ym. Kalibroinnin avulla kosteus voidaan määrittää yksikäsitteisesti ja tarkasti. Joillakin rikastenäytteillä absorbanssit eivät käyttäydy lineaarisesti kosteuden mukaan. Tällöin kalibrointi hankaloituu ja tarvitaan kehittyneempiä menetelmiä, jotta kosteus voidaan määrittää.

Tässä tutkimuksessa tutkittiin neuroverkkojen (kappaleet 4.2 ja 5.1) ja neurosumeiden menetelmien (kappaleet 4.3 ja 5.2) soveltuvuutta epälineaariseen kalibrointiin. Käytettävänä aineistona olivat yhden näytteen 14 eri kosteuden spektrit. Ongelmana kalibroinnissa oli mittauksien epävarmuus, jonka vuoksi mittauksista jouduttiin karsimaan pois ne, jotka näyttivät olevan virheellisiä. Lisäksi aineistoa interpoloitiin lisää menetelmäteknisistä syistä. Aineiston vähyyden vuoksi käytettävänä ei ollut riippumatonta testausaineistoa ja testausaineisto poimittiin opetusaineiston joukosta.

Yksi tärkeä tekijä kalibroinnissa on luotettavuus. Monimutkaisissa kalibroinneissa yksi malli ei välttämättä ole tarpeeksi luotettava kosteuden määrittämiseksi. Tässä tutkimuksessa pyrittiin kartoittamaan myös mahdollisia keinoja tuottaa lisäinformaatiota mittauksista, jotta kalibrointi voidaan varmentaa. Tällaisiksi keinoiksi osoittautui virheen ja piirre-erojen mallinnus (kappaleet 5.3 ja 5.4). Piirre-erot muodostuvat eri aallonpituuksilta mitattujen absorbanssien välille. Virhe puolestaan lasketaan ideaalisten ja mitattujen absorbanssien erotuksena.

## 2 MITTAUKSET

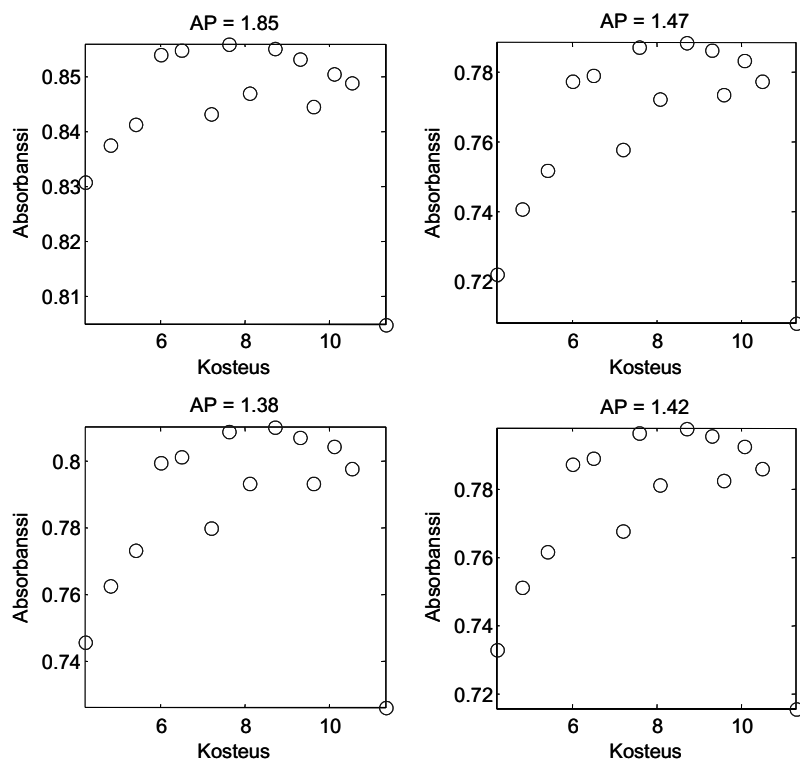
Kalibroinnissa käytettävänä aineistona ovat yhden näytteen 14 eri kosteuden lähi-infrapunaspektrit, jotka on tuotettu kromiittirikastenäytteistä /1/. Aineiston tuottivat Mika Hartikka ja Riikka Helisten. Spektrit on esikäsitelty jakamalla mitattu aineisto taustan aineistolla ja suodattamalla näin saatu aineisto Fourier-muunnoksen avulla /1/. Saaduista spektreistä (Kuva 1) poimittiin kalibrointia varten tiettyjen aallonpituuksien absorbanssit. Tähän tutkimukseen on valittu aallonpituudet 1.38  $\mu\text{m}$ , 1.42  $\mu\text{m}$ , 1.47  $\mu\text{m}$  ja 1.85  $\mu\text{m}$  aikaisempaan työhön pohjautuen /1/. Mittaukset sisältävät epävarmuutta johtuen mittausmenetelmistä sekä niiden toistettavuuteen liittyvistä seikoista /1/. Lisäksi mittauksia on liian vähän, jotta virheelliset mittaukset voitaisiin varmuudella tunnistaa ja poistaa aineistosta.



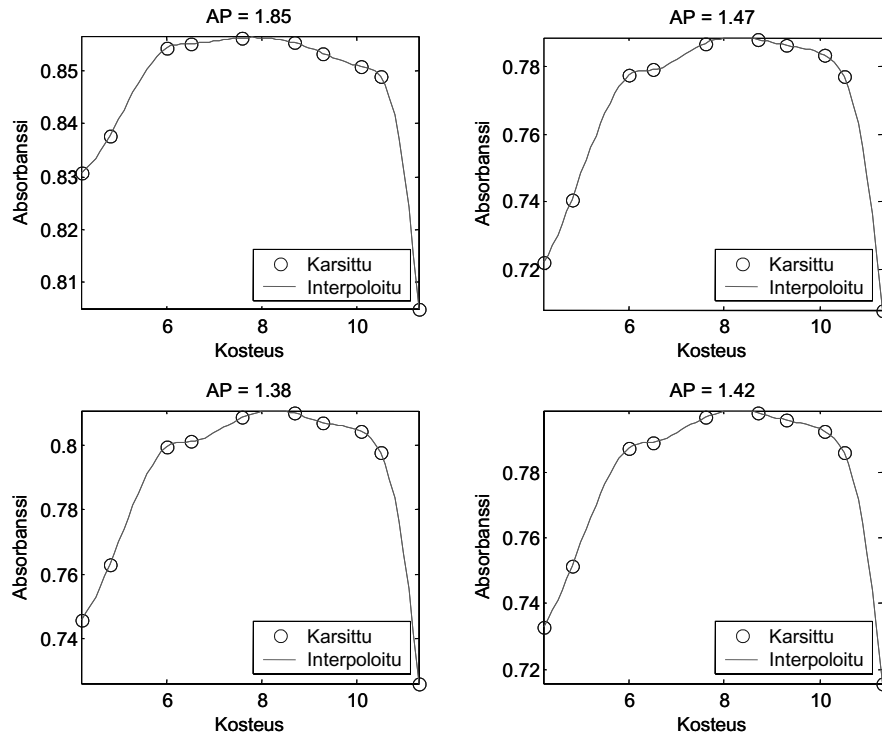
**Kuva 1.** Mittausaineisto /1/.

### 3 KALIBROINNISSA KÄYTETYT AINEISTOT

Mitatuista ja esikäsitellyistä spektreistä poimitaan kalibrointiaineisto eri aallonpituuksilta (1.38  $\mu\text{m}$ , 1.42  $\mu\text{m}$ , 1.47  $\mu\text{m}$  ja 1.85  $\mu\text{m}$ ). Kuvasta 2 havaitaan selkeästi mittauksissa esiintyvä hajonta. Poikkeavat mittauspisteet vaikeuttavat kalibrointia ja johtavat väärään kalibrointiin. Koska lisäaineistoa ei ole käytettävissä, ei voida päätellä, mitkä mittauksista ovat vääriä. Tämän vuoksi kalibrointiaineistona käytetään pisteitä, jotka näyttäisivät noudattavan parhaiten samaa linjaa (Kuva 3). Kalibrointeja varten aineistoa joudutaan myös interpoloimaan lisää. Interpolointi suoritetaan Matlab'in spline-funktiolla, käyttäen pohjana karsittua aineistoa (Kuva 3).



**Kuva 2.** Eri aallonpituuksilta poimittu aineisto.



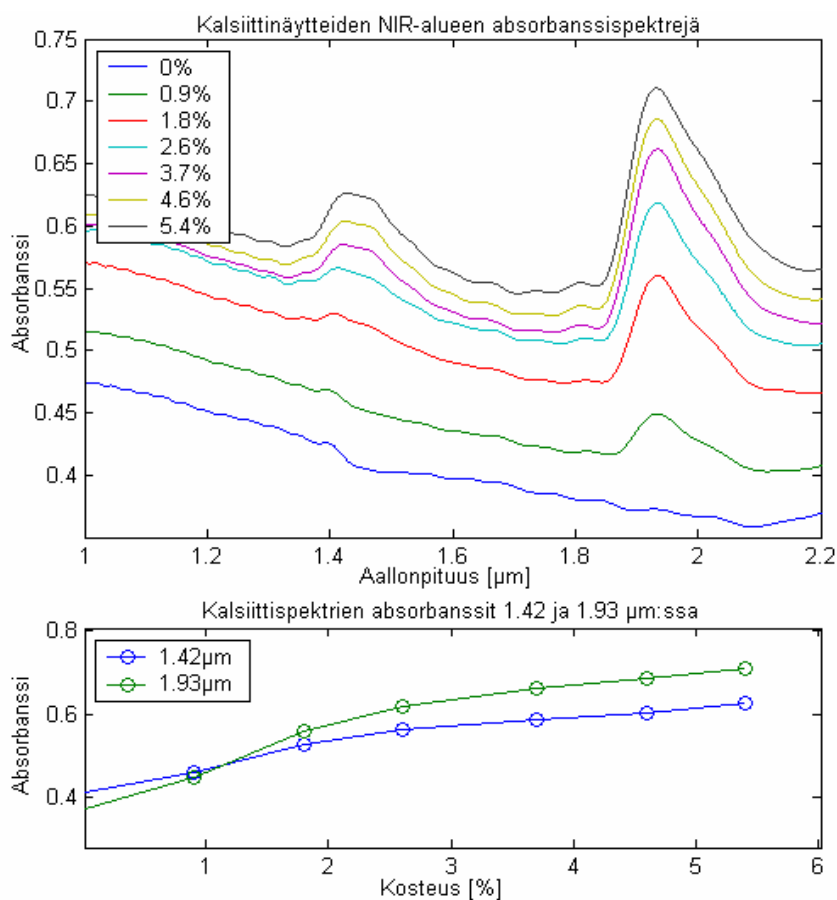
**Kuva 3.** Karsittu ja interpoloitu aineisto.

## 4 KALIBROINNISSA KÄYTETYT MENETELMÄT

Vesi ilmenee tyypillisesti lähi-infrapunaspektreissä aallonpituuksilla 1.43  $\mu\text{m}$  ja 1.94  $\mu\text{m}$  /1/. Kosteuden määrittäminen perustuu näiden aallonpituuksien absorptiospektreihin. Jostakin syystä rikastettujen näytteen vesinäyte ei näy veden tyypillisillä aallonpituuksilla eivätkä absorptiospektrit ole lineaarisia. Veden lisäys aiheuttaa kuitenkin muutoksia näytteen heijastuvassa spektrissä. Tämän vuoksi spektreistä tutkitaan ei-tyypillisiä aallonpituuksia ja kosteuden määrittämiseksi joudutaan käyttämään kehittyneempiä mallinnusmenetelmiä. Tässä tutkimuksessa valittiin mallinnusmenetelmiksi neuroverkot (kappale 4.2) ja neuro-sumeat menetelmät (kappale 4.3).

### 4.1 Lineaarinen kalibrointi

Ideaalitapauksessa absorptiospektrit ovat lineaarisia kosteuden suhteen. Kuvassa 4 on esitetty kalsiitin lähi-infrapunaspektrit ja absorptiospektrit tietyillä aallonpituuksilla. Kuten kuvasta 4 havaitaan, kalibrointisuorat molemmille aallonpituuksille voidaan muodostaa lineaarisella regressiolla. Suorien avulla kosteus voidaan määrittää yksikäsitteisesti.



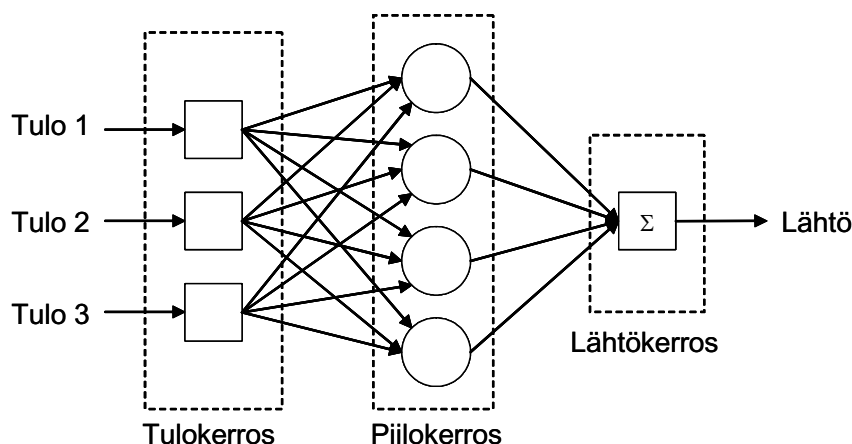
**Kuva 4.** Kalsiitin spektrit ja absorptiospektrit aallonpituuksilla 1.42  $\mu\text{m}$  ja 1.93  $\mu\text{m}$ . /1/.



## 4.2 Neuroverkkokalibrointi

Neuroverkkoja on käytetty vastaavanlaisissa ongelmallisissa kalibroinneissa /2, 3, ja 4/. Neuroverkot soveltuvatkin hyvin epälineaaristen funktioiden sovitukseen. Aikaisemman työn pohjalta /1/ on havaittu, että tässä sovelluksessa neuroverkoilla kalibrointi onnistuu. Heikkoutena aikaisemmassa työssä oli opetusaineiston rajallinen koko, joka rajoitti huomattavasti neuroverkon topologiamahdollisuuksia. Tässä tutkimuksessa neuroverkkojen opetusaineistona käytetään interpoloitua aineistoa (Kuva 3).

Neuroverkkojen käytössä on huomattava se, että neuroverkkojen opetustulos on riippuvainen painokertoimien alkuarvoista ja siten yksittäisistä opetuksista ei voida vetää johtopäätöksiä tietyn topologian soveltuvuudesta. Tässä tutkimuksessa käytetään eteenpäinkytkettyä backpropagation-verkkoa, sillä vastaavanlaisella verkolla on raportoitu hyviä tuloksia /3/. Verkko on kolmikerroksinen sisältäen tulo- ja lähtökerrokset sekä yhden piilokerroksen (Kuva 5). Yksi ongelma verkon käytössä on sopivien tulomuuttujien valinta /2/. Tulomuuttujat yhdessä piilokerroksen neuronien lukumäärän kanssa määräävät verkon monimutkaisuuden, jonka täytyy olla sopuoinnussa mallinnettavan ongelman kanssa. Tässä tutkimuksessa sopivaa verkkotopologiaa etsitään muuttelemalla tulojen sekä piilokerroksen neuronien lukumäärää systemaattisesti. Aktivaatiofunktioiden vaikutusta ei tässä tutkimuksessa tutkita. Aktivaatiofunktioina ovat hyperbolinen sigmoidifunktio (tansig) piilokerroksessa sekä lineaarinen funktio (purelin) lähtökerroksessa.



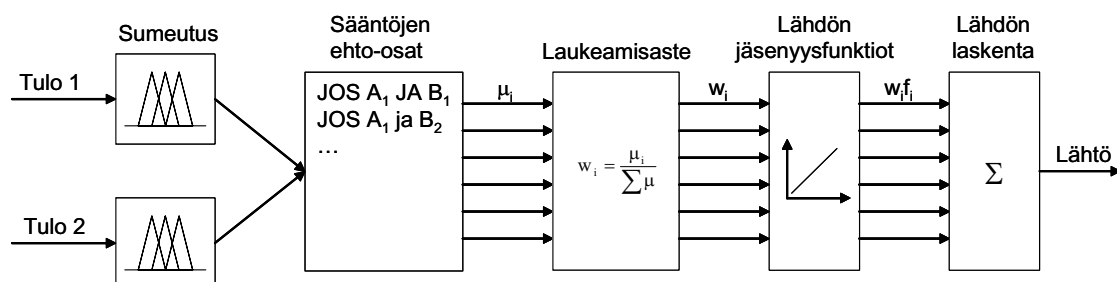
**Kuva 5.** Käytetty neuroverkko.

## 4.3 Neuro-sumeat menetelmät kalibroinnissa

Neuro-sumeissa menetelmissä (ANFIS = adaptive network based fuzzy inference system) yhdistetään sumeat menetelmät neuroverkkojen opetusalgoritmeihin. Neuro-sumeat järjestelmät voidaan viritellä asiantuntijatiedon ja opetusaineiston avulla ja niitä käytetään epälineaaristen funktioiden mallintamisessa /5/. ANFIS:lla muodostetaan Takagi-Sugeno-tyyppinen sumea malli, jonka jäsenyysfunktiot viritetään opetuksen aikana.

### 4.3.1 Takagi-Sugeno–tyyppiset sumeat systeemit

Takagi-Sugeno-tyyppisissä systeemeissä ehto-osa muodostuu sanallisista ilmaisuista ja johtopäätösosa yleensä lineaarisista matemaattisista funktioista /6/. Voidaan siis sanoa, että ehto-osa määrittelee, millä alueella tietty lineaarinen funktio on voimassa. Takagi-Sugeno-tyyppisissä sumeissa systeemeissä (Kuva 6) sääntöjen ehto-osien käsittely suoritetaan kuten sumeissa systeemeissä yleensä. Tulot sumeutetaan ja sumeutettujen tulojen avulla lasketaan ehto-osien jäsenyysasteet käyttäen T-normeja /6/. Ehto-osien jäsenyysasteista lasketaan kunkin säännön suhteellinen laukeamisaste, jolla painotetaan säännön johtopäätösosan funktion saamaa arvoa. Systeemin lähtö saadaan summaamalla painotetut funktioiden arvot /6/.



**Kuva 6.** Takagi-Sugeno –tyyppinen sumea systeemi (2 tuloa ja 1 lähtö).

### 4.3.2 Neuro-sumeat mallit

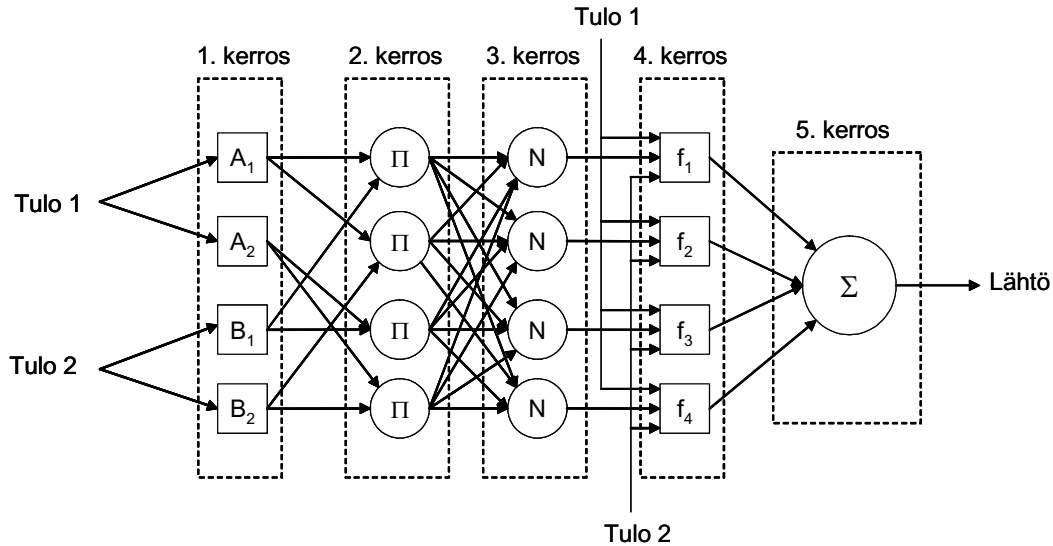
ANFIS-tyyppinen neuro-sumea malli muodostuu viidestä kerroksesta (Kuva 7). Ensimmäisessä kerroksessa tulomuuttujat sumeutetaan ja kerroksen neuronien lähdöt lasketaan kaavalla /5/:

$$y_{i,1} = \mu_{A_i}(x) \quad (1),$$

missä  $\mu_{A_i}$  on tulomuuttujan jäsenyysfunktio ja  $x$  on tulomuuttujan arvo.

Ensimmäisen kerroksen neuronit yhdistetään toisen kerroksen neuroneihin siten, että katetaan kaikki mahdolliset jäsenyysfunktioyhteydet. Kuvan 7 tapauksessa systeemin sääntökannaksi muodostuisi:

JOS  $A_1$  JA  $B_1$  NIIN  $f_1$   
 JOS  $A_1$  JA  $B_2$  NIIN  $f_2$   
 JOS  $A_2$  JA  $B_1$  NIIN  $f_3$   
 JOS  $A_2$  JA  $B_2$  NIIN  $f_4$



**Kuva 7.** Neuro-sumea malli (2 tuloa ja 1 lähtö).

Toisen kerroksen neuroneissa ensimmäisen kerroksen neuroneiden lähdöt  $y_{i,1}$  kerrotaan keskenään (voidaan käyttää myös muita T-normeja) /5/. Tämä vastaa ehtoosan jäsenyysasteen laskemista perinteisissä sumeissa systeemeissä. Kuvan 7 systeemille toisen kerroksen neuronien lähdöt lasketaan kaavalla:

$$y_{i,2} = \mu_{A_i}(x_1) \cdot \mu_{B_i}(x_2) \quad (2),$$

missä  $x_i$  on i:s tulomuuttuja.

Kolmannessa kerroksessa lasketaan jokaisen säännön suhteellinen laukeamisaste verrattuna muiden sääntöjen laukeamisasteisiin /5/. Näin saadaan painokertoimet, joilla painotetaan kunkin säännön johtopäätösosan funktion arvoa. Kuvan 7 systeemille kolmannen kerroksen neuronien lähdöt lasketaan kaavalla:

$$y_{i,3} = \frac{y_{i,2}}{\sum_{j=1}^4 y_{j,2}} \quad (3).$$

Neljännessä kerroksessa lasketaan johtopäätösosan funktion arvo ja painotetaan sitä säännön laukeamisasteella. Kuvan 7 systeemille neljännen kerroksen lähdöt lasketaan kaavalla /5/:

$$y_{i,4} = y_{i,3} \cdot f_i(x_1, x_2) \quad (4),$$

missä  $f_i(x_1, x_2) = p_i x_1 + q_i x_2 + r_i$ .

Viidennessä kerroksessa lasketaan systeemin lähtö summaamalla neljännen kerroksen lähdöt /5/:

$$y = \sum_{i=1}^I y_{i,4} = \sum_{i=1}^I y_{i,3} f_i = \frac{\sum_{i=1}^I y_{i,2} f_i}{\sum_{i=1}^I y_{i,2}} \quad (5).$$

Taulukkoon 1 on koottu ANFIS:in toiminnan keskeiset piirteet.

**Taulukko 1.** ANFIS:n toiminnan keskeiset piirteet.

| Piirre   | Kuvaus  |
|--|---|
| Tulomuuttujien jäsenyysfunktiot                    | Tulomuuttujien jäsenyysfunktiot ovat ensimmäisessä kerroksessa. Jäsenyys-funktiot viritetään opetuksen aikana.  |
| Lähtömuuttujien jäsenyysfunktiot                   | Lähtömuuttujien jäsenyysfunktiot ovat lineaarisia funktioita, $f(x_i)$ . Jokaiselle säännölle muodostetaan oma funktio, joka viritetään opetuksen aikana. |
| Sääntökanta  | Sääntökanta muodostuu ensimmäisen ja toisen kerroksen välisistä kytkennöistä.   |
| Ehto-osan jäsenyysasteen laskenta                  | Lasketaan toisessa kerroksessa (kaava 4). Voidaan käyttää haluttua T-normia (Kuvaan 6 on merkitty algebrallinen tulo).                                    |
| Säännön suhteellisen laukeamisasteen määrittäminen | Määritetään kolmannessa kerroksessa kaavalla 5.   |
| Kunkin säännön lähdön laskeminen                   | Lasketaan neljännessä kerroksessa painottamalla jäsenyysfunktioiden arvot kunkin säännön suhteellisella laukeamis-asteella (kaava 6).                     |
| Lähdön laskenta                                    | Lähtö lasketaan summaamalla kunkin säännön painotetut lähdöt (kaava 7).   |

### 4.3.3 Neuro-sumean mallin opetus

Viritettäviä parametreja verkossa ovat tulo- ja lähtömuuttujien jäsenyysfunktioiden parametrit. Parametrien määrä riippuu tulomuuttujien lukumäärästä ja tulomuuttujien jäsenyysfunktioiden määrästä ja muodosta. Esimerkiksi kellokäyrällä on 3 viritettävää parametria /5/. Olettaen kellokäyrän muotoiset jäsenyysfunktiot, kuvan 7 systeemillä on  $4 \cdot 3 = 12$  tulomuuttujien parametria ja  $4 \cdot 3 = 12$  lähtömuuttujien parametria. Koska viritettävien parametrien määrä on suuri, ongelmaksi opetuksessa saattaa muodostua ylioppiminen /7/.

Ylioppimisen välttämiseksi neuro-sumeat systeemit identifioidaan yleensä nk. hybridimenetelmällä, jossa yhdistyvät esimerkiksi pienimmän neliösumman ja jyrkimmän laskun menetelmät /7/. Pienimmän neliösumman käyttö vähentää ylioppimisen mahdollisuutta mutta ei poista sitä kokonaan. Tämantyyppisessä

hybridimenetelmässä laskenta etenee ensin ANFIS:n neljänteen kerrokseen asti. Tässä vaiheessa johtopäätösosan parametrit määritetään pienimmän neliösumman menetelmällä, jonka jälkeen lasketaan mallin lähdön ja halutun lähdön välinen virhe. Virhe syötetään verkossa takaisin päin ehto-osan parametrien virittämiseksi jyrkimmän laskun menetelmällä /5/. Voidaan siis sanoa, että tällä tavoin identifioidut neuro-sumeat mallit ovat eteenpäin kytkettyjä backpropagation-verkkoja.

## 5 KALIBROINTI

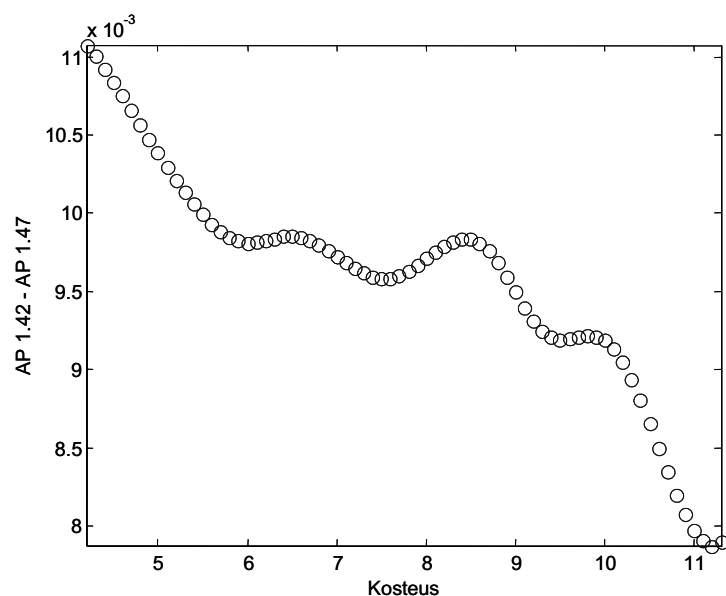
Kalibroinnissa tärkeää on luotettavuus. Suoraan mittauksista ei aina päästä korkeaan luotettavuuteen, jolloin luotettavuutta voidaan kasvattaa epäsuorilla, laskennallisilla mittauksilla. Seuraavaksi esitetään mallinnusmenetelmiä, joilla kosteus voidaan laskea suoraan mittausten perusteella. Sen jälkeen esitetään menetelmiä, jotka voidaan rakentaa tukemaan mitattuja ja laskettuja kosteuksia. Tässä tutkimuksessa ei oteta kantaa siihen, miten tuotettu informaatio tulisi yhdistää.

### 5.1 Suorien mittausten mallinnus neuroverkoilla

Kalibrointi suoritetaan käyttäen kappaleessa 4.2 kuvattua neuroverkkoa. Kalibroinnin onnistumiseen vaikuttaa voimakkaasti käytettävän verkon rakenne. Verkon rakenne optimoitiin nopeiden simulaatioiden avulla systemaattisesti kokeilemalla.

#### 5.1.1 Tulomuuttujien määrän vaikutus

Kokeiltaviksi tulomuuttujiksi valitaan aallonpituudet 1.47  $\mu\text{m}$  ja 1.85  $\mu\text{m}$  (Kuva 3) sekä aallonpituuksien 1.42  $\mu\text{m}$  ja 1.47  $\mu\text{m}$  välinen erotus (Kuva 8). Erotusta kokeillaan tulosuureena, sillä sen ja kosteuden välinen riippuvuus poikkeaa huomattavasti muiden muuttujien paraabelimaisista käyristä. Aikaisemmassa työssä [1] havaittiin, että sopiva neuronien lukumäärä on 2, jota käytetään parhaiden tulomuuttujien määrityksessä.



**Kuva 8.** Aallonpituuksista 1.42 ja 1.47 laskettu tulomuuttuja.

Eri tulomuuttujakombinaatioiden kokeiluissa käytettävä koesuunnitelma on esitetty taulukossa 2. Kokeet suoritetaan käyttäen Matlab:in Neural network –toolbox:in funktioita siten, että jokainen koe suoritetaan viiteen kertaan, jonka jälkeen tuloksia vertaillaan. Tuloksia arvioidaan neuroverkon testausaineistolle laskeman lähdön

neliöllisten virheiden keskiarvon perusteella. Neliöllisten virheiden keskiarvo (MSE = mean squared error) lasketaan kaavalla:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (6).$$

**Taulukko 2.** Koesuunnitelma tulomuuttujien määrittelemiseksi (A – aallonpituus 1.47µm, B – aallonpituus 1.85µm ja C – aallonpituuksien erotus).

|               |   |   |   |    |    |    |     |
|---------------|---|---|---|----|----|----|-----|
| Koe           | 1 | 2 | 3 | 4  | 5  | 6  | 7   |
| Tulomuuttujat | A | B | C | AB | AC | BC | ABC |

Simulointien MSE-arvot on esitetty taulukossa 3. Taulukosta havaitaan, että yksikään tulomuuttuja ei yksinään riitä kyllin tarkkaan kalibrointiin. Kahdella tulomuuttujalla ilmenee satunnaisesti matalia MSE-arvoja, jonka vuoksi niitä pystyttäisiin käyttämään kalibroinnissa (tästä tarkemmin kappaleessa 5.1.3). Kuten taulukosta 3 nähdään, kolmella tulomuuttujalla tulokset ovat tasaisimmat. Tämän vuoksi valitaan kokeen 7 tulomuuttujat käytettävän neuroverkon tulomuuttujiksi.

**Taulukko 3.** Simulointitulokset tulomuuttujien määrittämiseksi, MSE-arvot.

|     |   | Simulointikierron |       |       |       |       | Keskiarvo |
|-----|---|-------------------|-------|-------|-------|-------|-----------|
|     |   | 1                 | 2     | 3     | 4     | 5     |           |
| Koe | 1 | 3,315             | 3,324 | 3,294 | 3,351 | 4,317 | 3,520     |
|     | 2 | 4,329             | 4,307 | 3,479 | 4,060 | 4,018 | 4,039     |
|     | 3 | 4,329             | 1,073 | 1,065 | 1,065 | 1,073 | 1,721     |
|     | 4 | 4,329             | 4,329 | 0,165 | 0,029 | 0,169 | 1,804     |
|     | 5 | 4,329             | 0,104 | 0,298 | 0,298 | 4,329 | 1,871     |
|     | 6 | 0,261             | 4,329 | 4,329 | 0,520 | 4,329 | 2,754     |
|     | 7 | 0,023             | 0,136 | 0,136 | 0,136 | 4,329 | 0,952     |

### 5.1.2 Neuronien lukumäärän vaikutus

Kokeillaan erilaisia piilokerroksen neuronien lukumäärää edellisessä kappaleessa valituilla tulomuuttujilla. Käytettävä koesuunnitelma on esitetty taulukossa 4. Kuten edellisessä kappaleessa, kokeita toistetaan, jotta tulosten analysoinnista voidaan poistaa sattuman vaikutus.

**Taulukko 4.** Koesuunnitelma optimaalisen neuronien lukumäärän selvittämiseksi.

|               |   |   |   |   |   |   |   |   |    |
|---------------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|
| Koe           | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9  |
| Neuronien lkm | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |

Simulointitulokset on esitetty taulukossa 5. Taulukosta 5 havaitaan, että MSE-arvot ovat tasaisen pieniä, kun neuroneita on 4 tai enemmän. Sopiva neuronien lukumäärä onkin siis 4 varsinkin, kun neljällä neuronilla havaitaan myös paikallisesti erittäin alhaisia arvoja. Tässä yhteydessä on myös hyvä huomata se, että saatavilla ei ole riippumatonta testausaineistoa, jonka vuoksi neuronien lukumäärää ei pidä kasvattaa

liaksi, sillä todellisessa prosessissa tämä johtaisi verkon ylioppimiseen ja virheelliseen kalibrointiin.

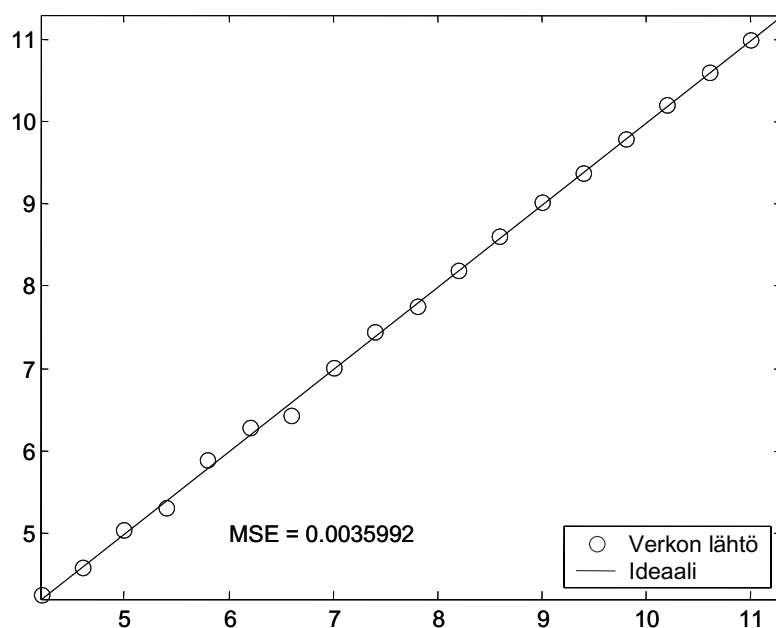
**Taulukko 5.** Simulointitulokset neuronien lukumäärän määrittämiseksi, MSE-arvot.

|     |   | Simulointikierrös |       |       |       |       | Keskiarvo |
|-----|---|-------------------|-------|-------|-------|-------|-----------|
|     |   | 1                 | 2     | 3     | 4     | 5     |           |
| Koe | 1 | 0,056             | 0,136 | 4,329 | 4,329 | 0,136 | 1,797     |
|     | 2 | 0,025             | 0,136 | 0,136 | 0,136 | 0,026 | 0,092     |
|     | 3 | 0,022             | 0,136 | 0,136 | 0,015 | 0,082 | 0,078     |
|     | 4 | 0,003             | 0,003 | 0,024 | 0,024 | 0,136 | 0,038     |
|     | 5 | 0,030             | 0,075 | 0,018 | 0,050 | 0,003 | 0,035     |
|     | 6 | 0,006             | 0,009 | 0,017 | 0,024 | 0,002 | 0,012     |
|     | 7 | 0,024             | 0,018 | 0,004 | 0,013 | 0,028 | 0,017     |
|     | 8 | 0,006             | 0,060 | 0,004 | 0,021 | 0,002 | 0,019     |
|     | 9 | 0,010             | 0,011 | 0,009 | 0,012 | 0,023 | 0,013     |

### 5.1.3 Kalibrointimalli

Kun verkon topologia on selvitetty muutamalla nopealla simuloinnilla, suoritetaan itse kalibrointi muutoin vastaavasti, mutta toistetaan verkon opetusta huomattavasti useammin, jotta löydettäisiin paras mahdollinen sovitus kalibrointikäyrälle. Kun opetusta toistetaan kyllin monta kertaa, on todennäköistä, että saavutetaan hyviä tuloksia myös yksinkertaisemmilla verkoilla. Tämän vuoksi voidaan käyttää myös niitä topologioita, joilla esiintyy matalia MSE-arvoja taulukoissa 3 ja 5.

Simuloitiin 100 kertaa verkkoa, jossa tulosuureina ovat kappaleessa 5.1.1 määritetyt muuttujat sekä piilokerroksessa 4 neuronina. Kuvassa 9 on esitetty paras kalibrointitulokset. Kuten kuvasta nähdään, kalibrointi on onnistunut erittäin hyvin.

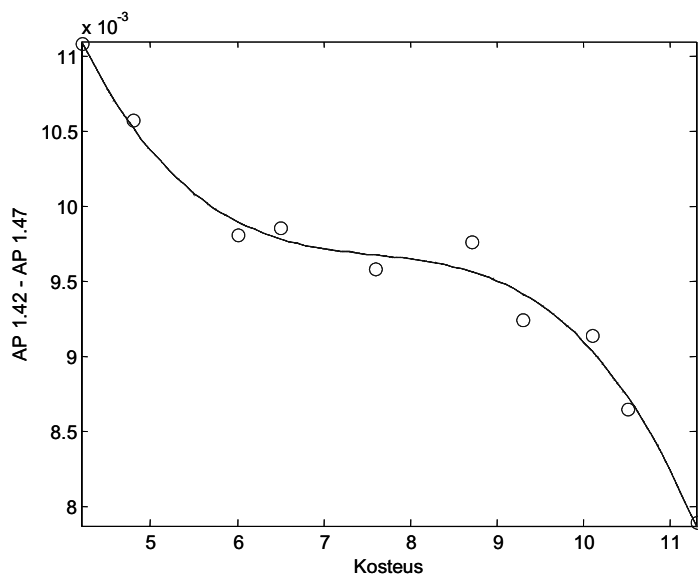


**Kuva 9.** Parhaiten onnistunut kalibrointi.

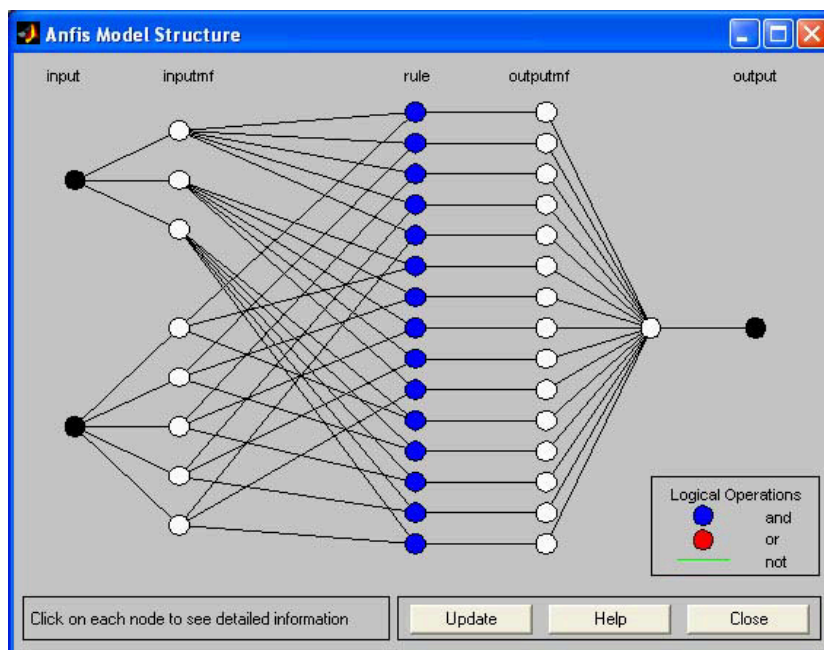


## 5.2 Suorien mittauksien mallintaminen neuro-sumeilla menetelmillä

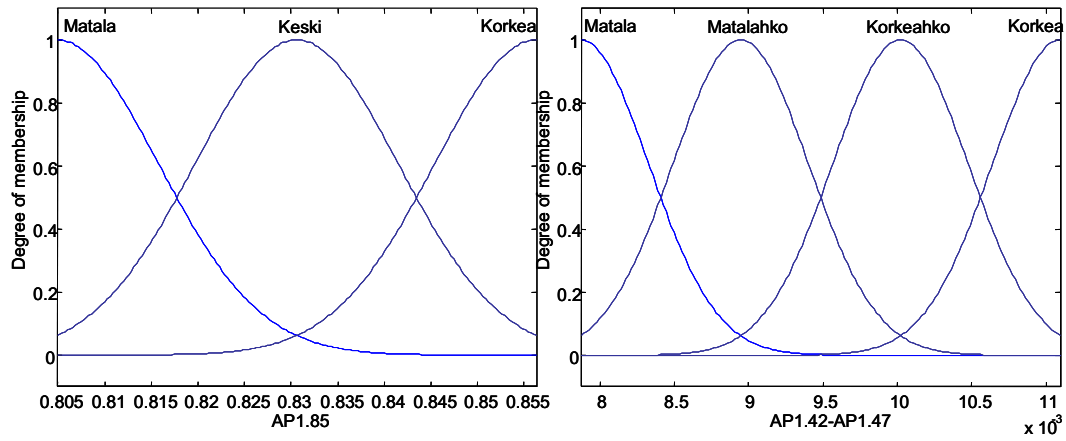
Valittiin tulomuuttujiksi aallonpituus  $1.85 \mu\text{m}$  (Kuva 3) ja aallonpituuksien  $1.42 \mu\text{m}$  ja  $1.47 \mu\text{m}$  erotus (Kuva 8). Muokattiin vielä jälkimmäistä tulomuuttujaa (Kuva 10), jotta sumea malli pysyisi yksinkertaisena. Sumean mallin lähtömuuttujaksi valittiin luonnollisesti kosteus. Määrättiin ensimmäiselle tulomuuttujalle 3 jäsenyysfunktioita ja toiselle 4. Muodostettu neuro-sumea malli on esitetty kuvassa 11 ja viritetyt tulomuuttujien jäsenyysfunktioita kuvassa 12. Muodostetun sumean mallin vuorovaikutuspinta on esitetty kuvassa 13 ja mallin laskemat lähdöt ja ideaali lähtö kuvassa 14. Kuvaan 14 on merkitty myös lähdön virheiden neliöllinen keskiarvo (MSE).



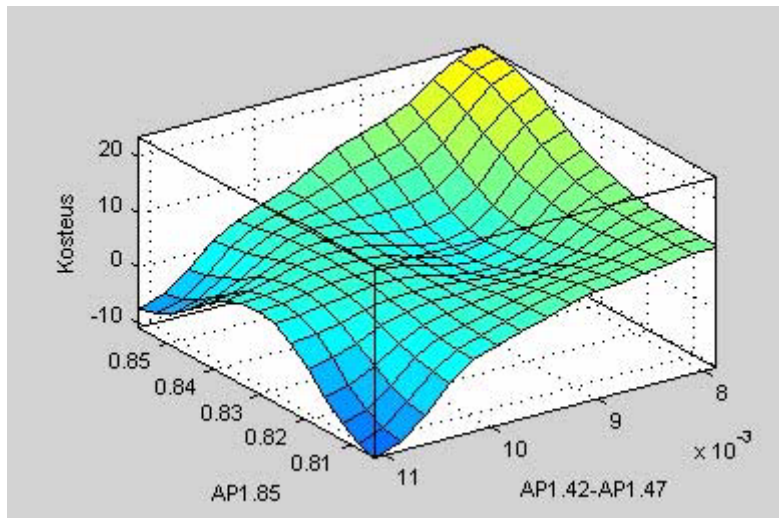
**Kuva 10.** Aallonpituuksien  $1.42 \mu\text{m}$  ja  $1.47 \mu\text{m}$  välinen erotus sekä pisteiden perusteella interpoloitu data.



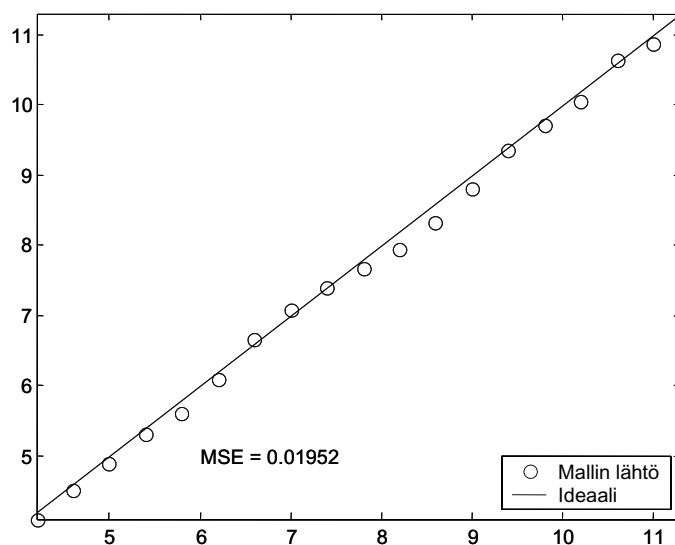
**Kuva 11.** Muodostettu neuro-sumea malli kahdelle tulomuuttujalle.



**Kuva 12.** Tulomuuttujien jäsenyysfunktiot.



**Kuva 13.** Neuro-sumean mallin vuorovaikutuspinta.



**Kuva 14.** Neuro-sumean mallin laskema ulostulo.

Kuvasta 12 huomataan, että automaattisesti viritetyt jäsenyysfunktiot ovat loogisia. Koska jäsenyysfunktiot viritetään opetusaineiston perusteella, on tärkeää, että opetusaineisto on tasaista ja edustavaa. Jos opetusaineisto sisältää paljon häiriöitä ja virheellisiä arvoja, viritetyt jäsenyysfunktiot eivät välttämättä kuvasta enää todellisuutta. Tämä ongelma ilmenee myös, jos tulomuuttujille valitaan liian monta jäsenyysfunktiota. Tällöin malli ylioppii, joka on ongelmana ANFIS:lla muodostetuilla malleilla kuten neuroverkoillakin. Liian tarkka opetusaineiston jäljitteleminen heikentää mallin yleistä käytettävyyttä.

Kuten kuvista 13 ja 14 havaitaan, kalibrointi onnistui hyvin myös neuro-sumealla mallilla. Neuroverkkoon verrattuna neuro-sumean mallin laskema lähtö on hiukan epätarkempi. On kuitenkin huomattava, että neuroverkossa käytettiin useampaa tulomuuttujaa kuin neuro-sumeassa mallissa. Kuvassa 13 voidaan havaita alue, jossa neuro-sumea malli ennustaisi negatiivisia kosteuksia. Tämä johtuu siitä, että nämä alueet eivät sisälly opetusaineistoon eikä mittauksen pitäisi koskaan päätyä näille alueille. Voidaan siis tehdä johtopäätös, että neuro-sumeat menetelmät soveltuvat kalibrointiin siinä, missä neuroverkotkin.

### 5.3 Virheen mallintaminen

Eräs lähestymistapa kalibrointiin on olettaa sen olevan lineaarinen (kuten kalsiitille kappaleessa 4.1) ja muodostaa ideaalinen kalibrointisuora murto-osalla saatavilla olevasta aineistosta. Tämän jälkeen lasketaan virhe ideaalisen ja todellisen tapauksen väliltä, joka mallinnetaan (Kuva 15). Virhettä käytettäessä kosteus lasketaan yhtälöstä:

$$y = f(x + e) = a(x + e) + b, \quad (7),$$

missä  $y$  on kosteus,

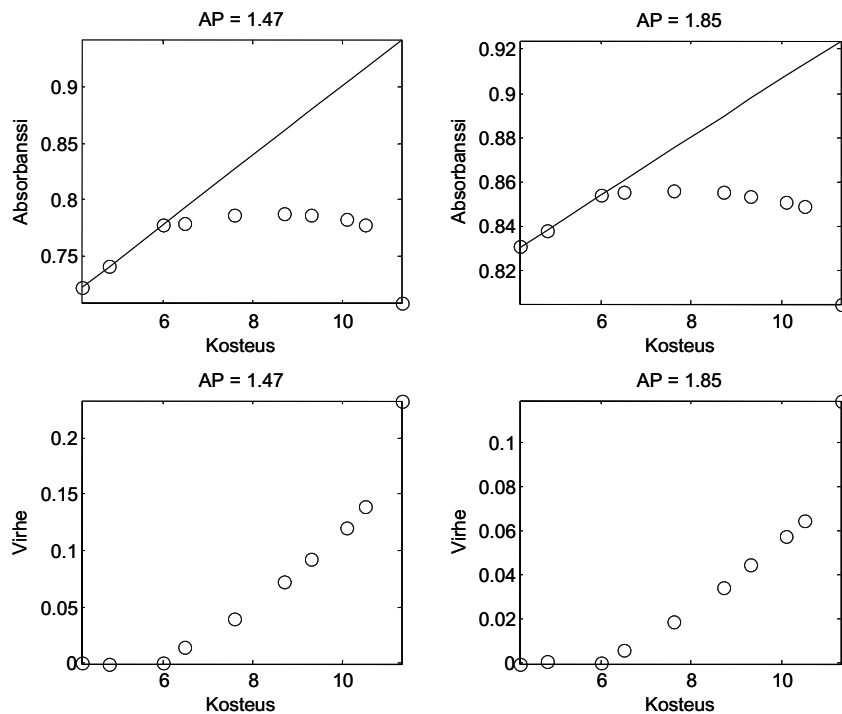
$f(x)$  on ideaalisen kalibrointisuoran yhtälö,

$x$  on mitattu absorbanssi,

$e$  on virhe ja

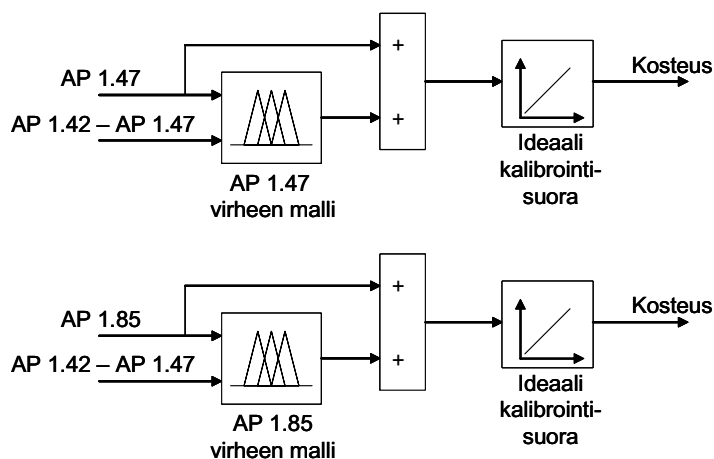
$a$  ja  $b$  ovat vakioita.

Kosteus voitaisiin laskea myös suoraan virheestä. Virheiden kuvaajissa (Kuva 15) havaitaan kuitenkin alue, jossa virhe on 0. Tällä alueella kosteutta ei voitaisi määrittää suoraan virheestä. Yhtälön 9 käyttämisellä saavutetaan myös se etu, että laskettu kosteus ei ole niin herkkä virheen suhteen, eikä täten virheen mallin tarvitse olla ”täydellinen”.



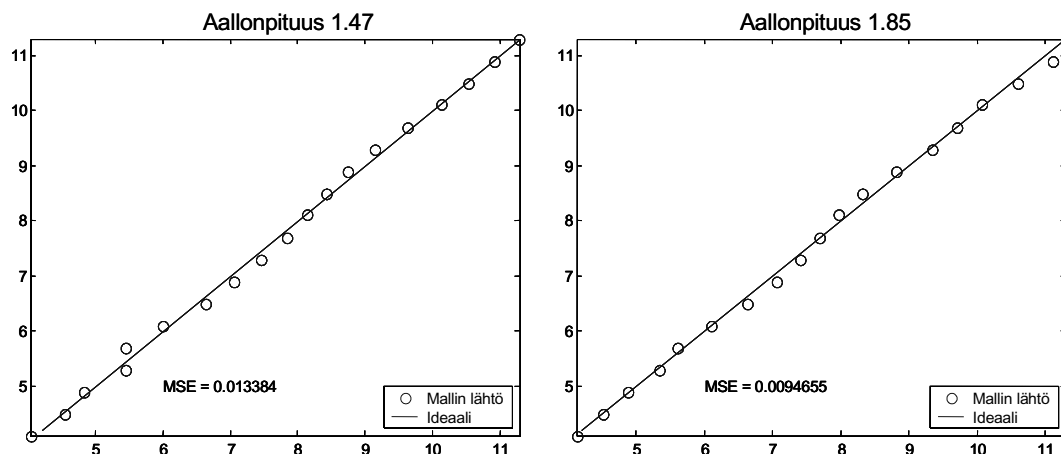
**Kuva 15.** Virheen muodostuminen eri aallonpituuksille.

Virhe voidaan mallintaa esimerkiksi neuroverkoilla tai neuro-sumeilla menetelmillä kappaleissa 4.2 ja 4.3 esitetyillä tavoilla. Tässä tutkimuksessa muodostettiin virheiden mallit (Kuva 16) käyttäen Matlab:in ANFIS-työkalua. Aallonpituuden 1.47  $\mu\text{m}$  virheen malliin valittiin tulomuuttujiksi ko. aallonpituusaineiston (Kuva 3) lisäksi aallonpituuksien 1.42  $\mu\text{m}$  ja 1.47  $\mu\text{m}$  välinen erotus (Kuva 10). Aallonpituuden 1.85  $\mu\text{m}$  virheen malliin valittiin vastaavat muuttujat.



**Kuva 16.** Yhtälön 9 mukaiset kosteusmallit.

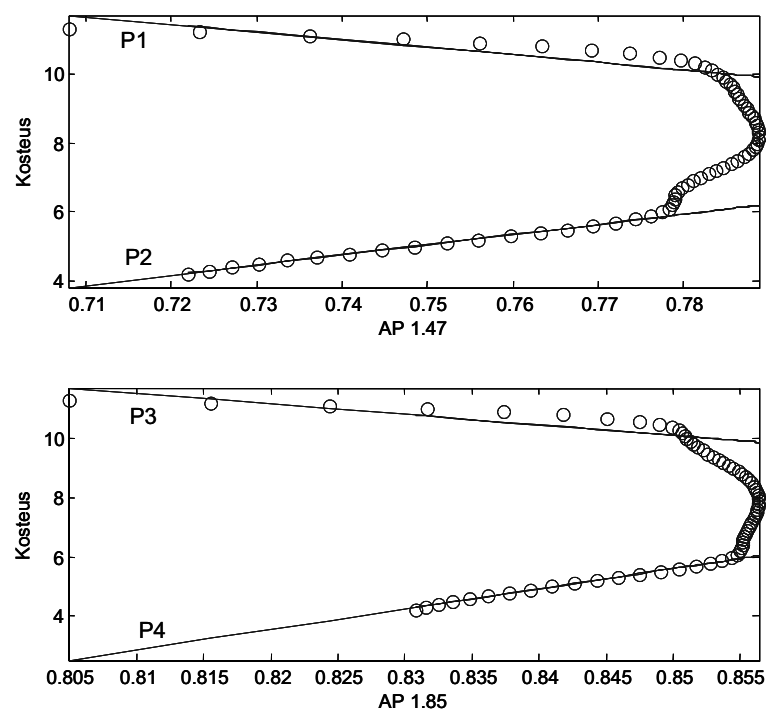
Mallien laskemat kosteudet sekä ideaalikosteudet on esitetty kuvassa 17. Todellisessa kalibroinnissa mallien laskemat kosteudet voitaisiin yhdistää esimerkiksi keskiarvolla. Tällöin yksittäisen mallin laskeman kosteuden virheet pienenisivät ja kalibrointi kokonaisuudessaan tarkentuisi.



Kuva 17. Mallien laskemat sekä ideaalikosteudet.

## 5.4 Piirre-erojen mallintaminen

Tässä lähestymistavassa pyritään löytämään eri aallonpituuksien aineistoista eroavaisuuksia, joiden mukaan kalibrointi voitaisiin suorittaa. Eräs tapa saada piirteet esille on sovittaa aallonpituusaineistoihin (Kuva 3) suorat matalille ja korkeille kosteuksille ja verrata eri suorien laskemien kosteuksien välisiä eroja. Tässä tutkimuksessa suorat sovitettiin siten, että interpoloidut aineistot (Kuva 3) jaettiin ensin kosteuden mukaan neljään osaan. Suorat sovitetaan nyt ensimmäiselle ja viimeiselle osalle (Kuva 18).

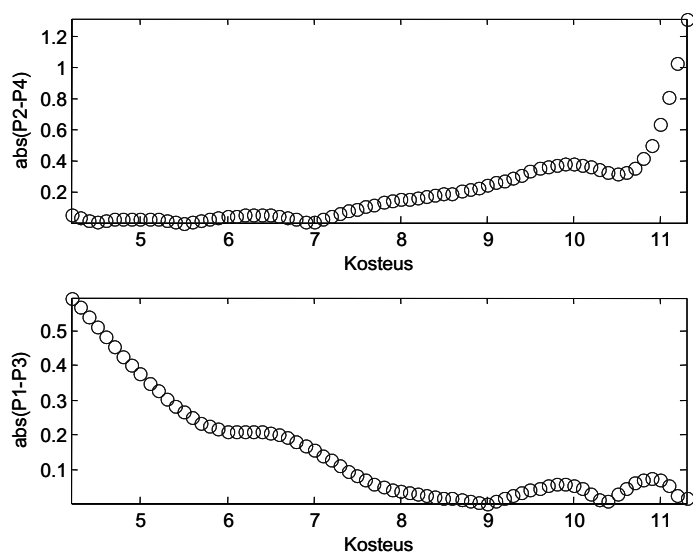


Kuva 18. Matalille ja korkeille kosteuksille viritetyt suorat ja interpoloitu aineisto.

Nyt, käytössä on siis 4 kalibrointisuoraa: kaksi matalille (P2 ja P4) ja kaksi korkeille (P1 ja P3) kosteuksille. Tämän jälkeen laskettiin kosteudet kaikkien suorien mukaan. Taulukkoon 6 on poimittu kalibrointisuorien ennustamia kosteuksia joillakin absorbanssin arvoilla. Havaitaan, että suorat P2 ja P4 ennustavat lähes samoja kosteuksia, kun todellinen kosteus on matala. Vastaavasti P1 ja P3 laskevat lähes samoja kosteuksia, kun todellinen kosteus on korkea. Tämä on luonnollista, sillä suorat P2 ja P4 oli viritetty matalille kosteuksille ja P1 ja P3 korkeille kosteuksille. Kuvassa 19 on esitetty suorien P2 ja P4 ennustamien kosteuksien poikkeama sekä suorien P1 ja P3 ennustamien kosteuksien poikkeama kosteuden funktiona. Kuvan 19 aineisto voidaan mallintaa esimerkiksi kappaleissa 4.1 ja 4.2 esitetyillä tavoilla.

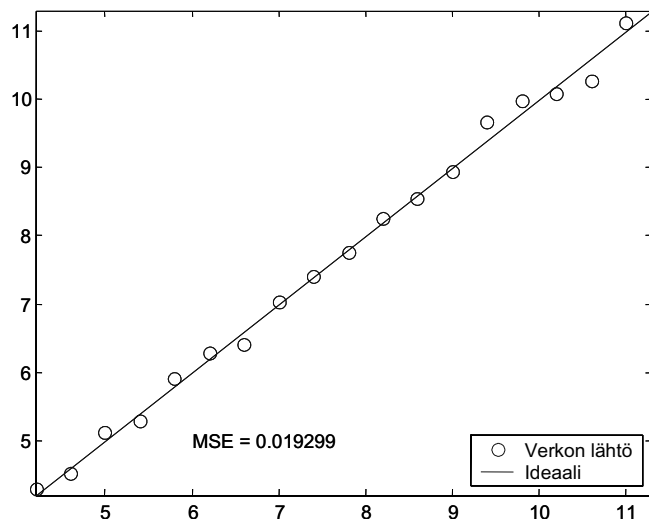
**Taulukko 6.** Kalibrointisuorien ennustamia kosteuksia ja näiden poikkeamia.

| Todellinen kosteus | P2   | P4   | abs(P2-P4) | P1    | P3    | abs(P1-P3) |
|--------------------|------|------|------------|-------|-------|------------|
| 4,2                | 4,23 | 4,29 | 0,05       | 11,38 | 10,79 | 0,59       |
| 5                  | 5,01 | 4,98 | 0,03       | 10,80 | 10,43 | 0,37       |
| 6                  | 5,86 | 5,90 | 0,04       | 10,16 | 9,95  | 0,21       |
| 7                  | 5,99 | 5,99 | 0,01       | 10,06 | 9,91  | 0,15       |
| 8                  | 6,19 | 6,04 | 0,15       | 9,92  | 9,88  | 0,04       |
| 9                  | 6,15 | 5,91 | 0,24       | 9,94  | 9,95  | 0,00       |
| 10                 | 6,05 | 5,67 | 0,38       | 10,02 | 10,07 | 0,05       |
| 11,3               | 3,82 | 2,51 | 1,31       | 11,69 | 11,71 | 0,02       |



**Kuva 19.** Suorien ennustamien kosteuksien poikkeamat kosteuden funktiona.

Nyt, kosteus mallinnettiin neuroverkkojen avulla. Tulomuuttujina verkossa ovat kuvan 19 poikkeamat. Verkon laskemat lähtökosteudet ja ideaalilähtö on esitetty kuvassa 20, josta nähdään, että kosteuden mallintaminen poikkeamien perusteella onnistui myös hyvin.



**Kuva 20.** Kosteus mallinnettuna poikkeamien funktiona.

## 5.5 Menetelmien yhdistäminen kalibroinnissa

Edellisissä kappaleissa muodostetut mallit ovat olleet joko neuroverkkoja tai neurosumeita malleja. Mallinnusta ei tarvitse kuitenkaan rajoittaa näihin, vaan mallinnuksen voi suorittaa muillakin menetelmillä. Tähän sovellukseen käytetyt menetelmät soveltuivat hyvin. Tässä tutkimuksessa kalibrointimenetelmät on jaoteltu karkeasti kahteen kategoriaan: kalibrointi suorien mittausten perusteella (kappaleet 5.1 ja 5.2) sekä kalibrointi epäsuorien mittausten perusteella (kappaleet 5.3 ja 5.4). Epäsuorilla mittauksilla tarkoitetaan laskennallisia suureita, joita on käytetty mallinnuksessa. Kalibroinnissa ei tarvitse kuitenkaan rajoittua esitettyihin malleihin, vaan mallin tulomuuttujiksi voidaan valita sekä suoria että epäsuoria mittauksia, jolloin mallin luotettavuus luonnollisesti paranee. Toinen mahdollisuus mallin luotettavuuden parantamiseksi on rakentaa useita kosteutta ennustavia malleja ja yhdistää näiden tulokset. Kun käytössä on useita arvoja, joiden perusteella kosteus määritetään, voidaan käyttää tilastollisia menetelmiä laskentatuloksen arvioimiseksi. Tätä kautta mittauksesta voidaan tuottaa ylimääräistä informaatiota sen luotettavuudesta, jota voidaan hyödyntää prosessin ohjauksessa.

## 6 TULOSTEN TARKASTELU

### 6.1 Kosteuden mallintaminen suoraan mittauksista

Kosteus mallinnettiin suoraan mittauksista neuroverkoilla ja neuro-sumeilla menetelmillä. Molemmilla menetelmillä päästiin hyviin tuloksiin. Kummassakin menetelmässä ongelmana on sopivan mallirakenteen löytäminen, jonka määrää pääasiassa tulomuuttujien lukumäärä. Kun optimaalinen tulomuuttujien määrä on selvitetty, mallirakenteet voidaan virittää sopiviksi etsimällä sopiva neuronien tai jäsenyysfunktioiden lukumäärä riippuen mallinnusmenetelmästä.

Neuroverkoilla tulomuuttujiksi valittiin kolme aallonpituutta, joista aallonpituuksia 1.47  $\mu\text{m}$  ja 1.85  $\mu\text{m}$  käytettiin suoraan sekä kolmantena tulomuuttujana aallonpituuksien 1.42  $\mu\text{m}$  ja 1.47  $\mu\text{m}$  välistä erotusta, sillä se antoi keskimäärin parhaat tulokset. Kuten kappaleessa 5.1 mainitaan, myös kahden tulomuuttujan malleja voidaan käyttää, sillä tavoitteena on löytää yksi malli, jonka tarkkuus on riittävä. Kriteerinä ei siis välttämättä kannata pitää keskimääräistä tarkkuutta, vaan kunkin mallirakenteen parasta mahdollista tarkkuutta. Tällöin tutkitaan kunkin mallirakenteen mahdollisuutta mallintaa kyseinen ongelma riittävän tarkasti.

Muodostetussa neuro-sumeassa kalibroitimallissa käytettiin kahta tulomuuttujaa. Kuten neuroverkoilla, myös neuro-sumeaan malliin voidaan sisällyttää useampia tulomuuttujia.

Käytännön kannalta molemmissa menetelmissä ongelmana on mallin ylioppiminen, joka johtuu liian monimutkaisesta mallirakenteesta. Tässä tutkimuksessa mallinuksissa ei ollut ylioppimisen ongelmaa, sillä opetusaineistona käytettiin interpoloitua aineistoa, josta testausaineisto poimittiin. Käytännön ongelmissa riippumattoman testausaineiston käyttö opetuksen onnistumisen kriteerinä on välttämätöntä mallin ylioppimisen estämiseksi.

Menetelmien käytettävyydessä ei ole huomattavasti eroja, sillä molemmat mallit opetetaan aineiston perusteella. Tällöin mallit voidaan virittää uudelleen hyvin nopeasti vastaamaan muuttuneita kosteuksien ja mittausten riippuvuuksia.

### 6.2 Epäsuorien mittausten mallintaminen

Epäsuorien mittausten mallintaminen onnistui hyvin. Molempia esitettyjä menetelmiä voidaan käyttää kalibroinnissa. Molemmissa menetelmissä ongelmallista on suorien sovittaminen, jonka vuoksi virheen mallintamista on ehkä varmempi käyttää, sillä siinä sovitetaan vain yksi suora aallonpituutta kohti.



## 7 YHTEENVETO

Esitetyt menetelmät soveltuvat hyvin epälineaariseen kalibrointiin. Sekä neuroverkoilla että neuro-sumeilla menetelmillä voidaan tuottaa kalibrointiin tarvittavat mallit. Molemmat menetelmät soveltuvat myös on-line -käyttöön, sillä mallit voidaan päivittää nopeasti vastaamaan uusia toimintaolosuhteita.

Epäsuoria mittauksia voidaan käyttää tukemaan suoria mittauksia. Esitetyt epäsuorat mittaukset soveltuvat hyvin tarkoitukseensa. Vaikeutena epäsuorien mittausten muodostamisessa on siinä käytettävien suorien sovitus. Virheen muodostamisessa sovitetaan vain yksi suora aallonpituutta kohti, jonka vuoksi se lienee varmempi menetelmä.

Kalibrointiin aiheuttaa ongelmia aineiston vähyys ja sen epävarmuus. Menetelmät soveltuivat hyvin käytetylle aineistolle, mutta niiden yleisen käytettävyyden toteamiseksi pitää mittausten määrää kasvattaa, jotta mallit voidaan muodostaa suoraan mittauksista karsitun ja interpoloidun aineiston sijaan.

## LÄHDELUETTELO

1. Helisten R. 2004: Sintrausseoksen kosteuden mitattavuudesta lähi-infrapunatekniikalla. Diplomityö, Oulun yliopisto.
2. Bertran E., Blanco M., MasPOCH S., Ortiz M.C., Sánchez M.S. and Sarabia L.A.: Handling Intrinsic Non-linearity in Near-infrared Reflectance Spectroscopy. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 49(1999), 215-224.
3. Blanco M., Coello J., Iturriga H., MasPOCH S. and Pagès J.: Calibration in Non-linear Near Infrared Reflectance Spectroscopy: a Comparison of Several Methods. *Analytica Chimica Acta*, 384(1999), 207-214.
4. Rantanen J., Räsänen E., Antikainen O., Mannermaa J.-P. ja Yliruusi J.: In-line Moisture Measurement During Granulation with a Four-wavelength Near-infrared Sensor: an Evaluation of Process-related Variables and a development of Non-linear Calibration Model. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 56(2001), 51-58.
5. Jang J.-S.R.: ANFIS: Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 23(1993)3, 665-685.
6. Driankov D., Hellendoor H. and Reinfrank M.: *An Introduction to Fuzzy Control*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, pp. 316.
7. Babuska R. and Verbruggen H.: Neuro-Fuzzy methods for Nonlinear System Identification. *Annual Reviews in Control*, 27(2003), 73-85.